УДК 517.958 : 517.988.8

ЗАСТОСУВАННЯ НЕЙРОННИХ МЕРЕЖ ДЛЯ РОЗВ'ЯЗАННЯ КРАЙОВИХ ЗАДАЧ ДЛЯ ЗВИЧАЙНИХ ДИФЕРЕНЦІАЛЬНИХ РІВНЯНЬ

Леховіцький Д.О.
Науковий керівник – д-р фіз.-мат. наук, проф. Сидоров М.В.
Харківський національний університет радіоелектроніки, каф. ПМ
м. Харків, Україна
e-mail: dmytrii.lekhovitskyi@nure.ua

This paper considers application of feed-forward neural networks to solving boundary value problems for ordinary differential equations. As universal function approximators, neural networks can help dealing with the problems on which classical methods fail, including those with non-linearity, high dimentionality, and complex domain boundary. Particularly, we show how to construct an objective function to fit the feed-forward neural network approximating a solution to an ordinary differential equation with mixed boundary conditions.

Крайові задачі посідають центральне місце при математичному моделюванні фізичних, біологічних, економічних та багатьох інших явищ та процесів. Більшість з практично важливих задач цього типу не розв'язуються аналітично та вимагають застосування наближених чисельних методів. На сьогоднішній день запропоновано та досліджено багато таких підходів, найбільшого поширення серед яких набув метод скінченних елементів через свою універсальність та інші практичні переваги. Тим не менш, стрімкий розвиток технологій глибинного навчання як узагальненого методу побудови апроксиматорів та «нативна диференційованість» нейронних мереж спонукає спробувати застосувати їх для розв'язування крайових задач з метою подальшого покращення ефективності та стабільності існуючих підходів.

У загальному випадку крайова задача полягає в пошуку невідомої функції, що має задовольняти основне диференціальне рівняння всередині заданої області та додаткові умови (зазвичай, диференціальні співвідношення меншого порядку, ніж основне) на її межі. Поширеними типами крайових умов є умови Діріхле, коли фіксується значення шуканої функції на межі області, та умови Неймана, коли фіксується значення її першої похідної. Коли задано одночасно два типи умов, крайову задачу називають мішаною.

Для звичайних диференціальних рівнянь область вироджується у відрізок, а її межа – в його кінці. Приклад крайової задачі для звичайного диференціального рівняння з диференціальним оператором $\mathcal{D}$ та мішаними умовами має вигляд:

$$\mathcal{D}u(x) = f(x) \text{ для всіх } x \in (a, b),$$

$$u(a) = A,\ u'(b) = B.$$

Одним із класичних підходів до чисельного розв'язування таких задач є метод колокацій, що полягає у виборі параметричної сім'ї достатньо гладких функцій $\hat{u}(x;\mathbf{p})$ (наприклад, поліномів не старше заданого степеня), виборі набору точок всередині відрізка $\{x_i\}_{i=1}^N$ (їх називають точками колокації) та пошуку таких значень параметрів, за яких функція задовольняє основне диференціальне рівняння в обраних точках та крайові умови.

Нейронні мережі прямого поширення є іншим доцільним кандидатом параметричної сім'ї $\hat{u}(x;\mathbf{p})$, оскільки мають теоретичні гарантії щодо здатності апроксимувати будь-яку неперервну функцію [1], а бібліотеки автоматичного диференціювання на кшталт TensorFlow чи Torch дозволяють швидко обчислювати похідні високих порядків.

Для крайової задачі для звичайного диференціального рівняння варто обрати нейронну мережу з одним входом та одним виходом. Навчання, тобто підбір параметрів, мережі відбувається шляхом мінімізації деякого цільового функціоналу, що називається функцією втрат. Для цього, замість пошуку параметрів за яких умови задовольняються точно, переходять до мінімізації зважених нев'язок:

$$\sum_{i=1}^{N}(f(x_i)-\mathcal{D}\hat{u}(x_i;\mathbf{p}))^2+\alpha(\hat{u}(a;\mathbf{p})-A)^2+\beta(\hat{u}'(b;\mathbf{p})-B)^2 .$$

Для загальнішого випадку диференціального рівняння з частинними похідними обирають мережу з більшою кількістю входів, а точки колокації обираються не лише всередині області, але й на її межі, що приводить до появи додаткових членів у цільовій функції.

Метод показує гарні результати в сенсі точності та швидкості збіжності для різних типів рівнянь та крайових умов, однак емпіричні результати свідчать, що метод скінченних елементів перевершує нейронні мережі по обох показниках для деяких типів задач [2]. Потенційним напрямком для покращення є адаптивна стратегія вибору точок колокації, коли більше точок обирається в тих ділянках області, де нев'язка є більшою [3].

Список використаних джерел:

1. Cybenko G. Approximation by superpositions of a sigmoidal function. *Mathematics of Control, Signals, and Systems*. 1989. № 2. Pp. 303–314. https://doi.org/10.1007/BF02551274

2. Sacchetti A., Bachmann B., Löffel K., Künzi U.-M., Paoli B. Neural networks to solve partial differential equations: a comparison with finite elements. *IEEE Access*. 2022. № 10. Pp. 32271–32279. https://doi.org/10.1109/ACCESS.2022.3160186

3. Anitescu C., Atroshchenko E., Alajlan N., Rabczuk T. Artificial neural network methods for the solution of second order boundary value problems. *Computers, Materials & Continua*. 2019. № 59 (1). Pp. 345–359. https://doi.org/10.32604/cmc.2019.06641